



TITLE:

クラスターイオンビームと固体表面の相互作用

AUTHOR(S):

龍頭, 啓充

CITATION:

龍頭, 啓充. クラスターイオンビームと固体表面の相互作用. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2014, 2013: 99-101

ISSUE DATE:

2014-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/186367>

RIGHT:

クラスターイオンビームと固体表面の相互作用

Interaction between cluster ion beams and solid surfaces

京都大学大学院 工学研究科 附属光・電子理工学教育研究センター 龍頭啓充

背景と目的

今日イオンビーム技術は、半導体工業をはじめとする様々な産業分野において広く利用されている。中でも半導体デバイス製造においては、イオン注入や微細加工の鍵となる技術として、欠かすことが出来ないものである。近年の更なる微細化のため10nm以下の極めて浅い領域へのイオン注入が必要であり、これには多原子分子イオンの利用が有効である。多原子分子イオンは短飛程で、高い質量電荷比を持つため、実用的なビーム強度で、極めて浅いイオン注入を実現出来る。一方で多原子分子は様々な元素の組合せや、多種多様な官能基を有するため、新規な表面処理・修飾への応用も期待できる。

我々は、多原子分子イオンビームの材料として直鎖アルカンを用い、その照射効果を検討してきた。電子衝撃法を用いたイオン化により、 $C_nH_{2n+1}^+$ ($n = 2-12$)の種々のフラグメントイオンが生成される。本研究では、*n*-テトラデカン($C_{14}H_{30}$)から生成されるフラグメントの、 C_3H_7 分子、 $C_{12}H_{25}$ 分子イオンのSi(100)表面への照射効果について予備研究にて評価している。図1に $C_3H_7^+$ 、 $C_6H_{13}^+$ および $C_{12}H_{25}^+$ を照射したSi(100)の表面段差測定結果を示す。それぞれの分子イオンを数kVで加速し、照射炭素量を 4.0×10^{16} carbons/cm²として照射している。1炭素原子当りのエネルギーで比較すると、 C_3H_7 は表面段差が正方向に増加し、 $C_{12}H_{25}$ は表面段差が負方向に変化する傾向であることがわかる。これは1炭素原子当たりのエネルギーが同程度であっても、分子サイズに依存して堆積とエッチングが生じていることを意味している。しかしながら、いかしてこれら堆積やエッチングが生じているかは明らかとなっていない。このため、第一原理計算を用い検討を行なった。

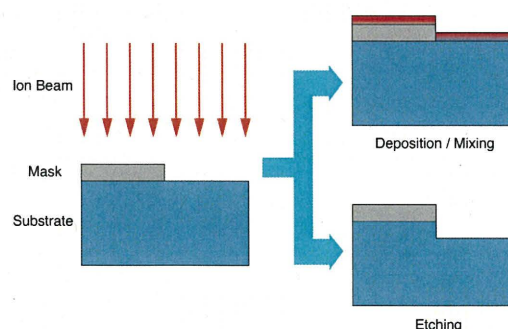
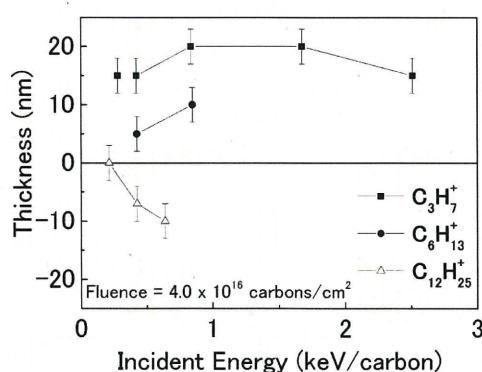


図 1: $C_3H_7^+$ 、 $C_6H_{13}^+$ および $C_{12}H_{25}^+$ を 4×10^{16} carbons/cm² 照射した Si(100)の表面段差。

左図は実験結果、右図はイオン照射の模式図。

検討内容

$C_{12}H_{26}$ 分子を Si(100) 表面へ縦(長手)方向に入射した場合について計算を行った。計算には、Materials Studio 6.1 および 7.0 の第一原理計算コード CASTEP を用いた。図 1 に初期状態のシリコン結晶(100)及び入射分子の配置を示す。シリコン結晶は単位格子 $2 \times 2 \times 2.75$ セルとし、真空層として 2.5nm を作成した。 $C_{12}H_{26}$ 分子に基板表面に垂直に入射する方向の初速度を与え、シリコン表面と C_3H_8 および $C_{12}H_{26}$ 分子の衝突のシミュレーションを行った。初速度は、炭素原子 1 個当たりの入射エネルギーが 50 eV の場合に相当する 25.8 nm/ps と設定した。計算時間については、イオン注入のシミュレーションコードの SRIM[1]を用い、50eV の C 原子が Si に入射して停止するまでの時間を 70-130 fs と見積もられたため、これを基準とした。

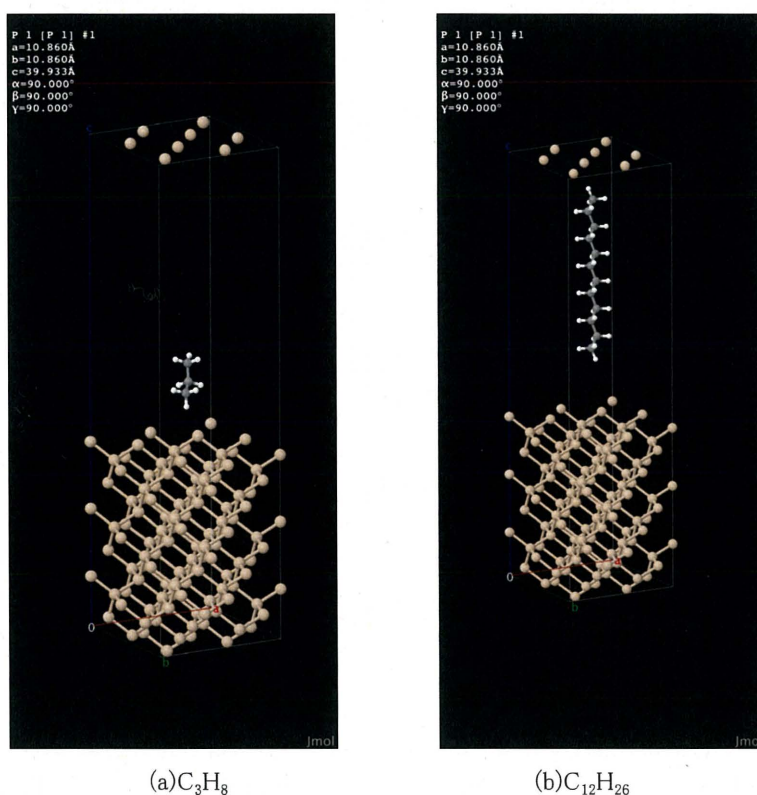
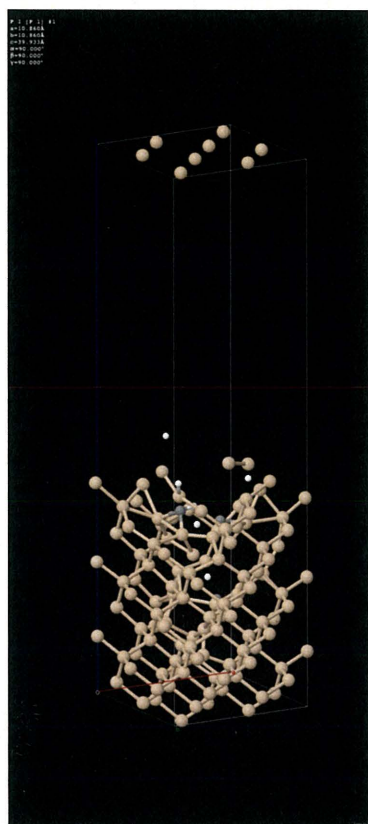


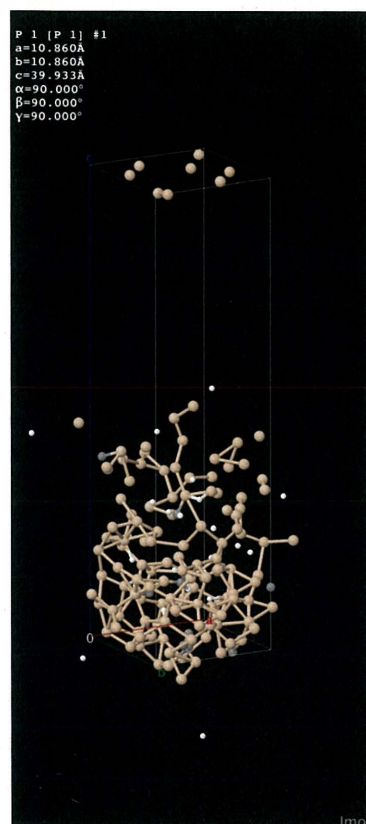
図 2: シリコン結晶に入射する C_3H_8 分子および $C_{12}H_{26}$ 分子の配置(初期状態)

結果及び考察

図 3 に Si 表面に入射した時点から 72fs 経過後の C_3H_8 分子および 125fs 経過後の $C_{12}H_{26}$ 分子のシミュレーション結果を示す。 C_3H_8 分子では、3 個の炭素原子のうち 2 個が最表面と 2 層目の Si に、1 個は 4 層目の Si と結合しており注入深さが浅いことがわかる。この注入深さのレンジは SRIM による計算とほぼ一致するため、C 原子単体のイオン注入と同様の相互作用となっていると考えられる。一方 $C_{12}H_{26}$ 分子では、衝突の際に $C_{12}H_{26}$ 分子のうちの先行する原子が衝突初期において、基板原子を押しつける「露はらい効果」により、後続の炭素原子がエネルギーを失うことなく固体内へ侵入していることがわかる、また、 $C_{12}H_{26}$ 分子の構成原子が同時に Si 結晶表面に衝突し、狭い範囲の Si 格子に高密度にエネルギーを付与することとなり、Si 表面原子の結合が切れ表面から活発に脱離する様子が見られる。これらのことから、本シミュレーションは定性的に実験結果と一致していると考えられる。



(a) C_3H_8 (70 fs 後)



(b) $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$ (125 fs 後)

図 3: 入射開始から(a) 70 fs 後の C_3H_8 分子および(b)125 fs 後の $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$ 分子の分子動力学計算結果

参考文献

- [1] J.F. Ziegler, J. Biersack, U. Littmark, “The Stopping and Range of Ions in Matter”, Pergamon Press, 1985.